

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ
ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ**

А.Д. Афанасьева¹, С.Б. Аркенова¹, Т.А. Калиев^{1,2}

Научные руководители: профессор Е.Н. Ивашкина¹, научный сотрудник Н.С. Белинская¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

²ТОО «Павлодарский нефтехимический завод», г. Павлодар, Казахстан

До 2024 года приоритетным направлением развития российской экономики является ее цифровая трансформация или цифровизация. Стоит отметить, что данное направление касается не только экономики, но и промышленности. Внедрение цифровых технологий в промышленное производство предполагает следующий ряд преимуществ [6]:

- повышение гибкости производства за счет быстрого и динамического изменения характеристик производственного процесса.
- информационная интеграция этапов жизненного цикла производимой продукции, позволяющей эффективно и комплексно решать задачи оптимизации собственно производства, качества продукции, экологической безопасности и создания новых бизнес-возможностей для промышленности.

Нивелирование потребности в интеллектуализации и цифровизации производства, в том числе в нефтеперерабатывающей промышленности, возможно путем разработки и внедрения в управление производством математических моделей химико-технологических процессов и программных продуктов, разработанных на их основе [5].

Внедрение современных интеллектуальных технологий на действующие нефтеперерабатывающие заводы связано с необходимостью [2]:

1. увеличения производительности для удовлетворения растущего спроса на топливные продукты;
2. соответствия требований к качеству конечных нефтепродуктов;
3. адаптация существующих и внедрение новых технологий переработки тяжелого нефтяного сырья, содержащего значительное количество соединений серы и металлов.

Все эти обстоятельства вынуждают предварительно облагораживать тяжелые нефти, чтобы иметь возможность перерабатывать их в больших объемах. Процессы гидропереработки нефтяного сырья позволяют решить эту сложную задачу [2].

Цель работы – разработка математической модели процесса гидроочистки вакуумного газойля, пригодной для прогнозирования состава и свойств сырья процесса каталитического крекинга.

Для достижения поставленной цели на первом этапе требуется установить и проанализировать основные физико-химические закономерности промышленного процесса гидропереработки.

Процесс проводят под давлением 4-8 МПа при температуре 350-450 °С, объемной скорости 0,8-1,2 ч⁻¹ и циркуляции водородсодержащего газа 360-600 м³/м³ сырья в присутствии катализаторов [4].

В качестве сырья процесса гидроочистки вакуумных дистиллятов используются вакуумный, легкий вакуумный и тяжелый вакуумный газойли с добавлением в ходе процесса тяжелого газойля установки замедленного коксования и фракций 330-360 °С и 350-450 °С.

Вакуумный газойль имеет температуру начала кипения около 360 °С, а температуру конца кипения приблизительно 540 °С что соответствует углеводородам C₁₆-C₅₀. С химической точки зрения вакуумный газойль представляет собой сложнейшую смесь различных углеводородов, гетероциклических соединений серы и азота [4] и металлорганических соединений.

Предварительное гидрогенизационное облагораживание сырья осуществляется за счет удаления из нефтепродуктов гетероатомных соединений и частично полициклических ароматических соединений в среде водорода на катализаторах.

В рамках данной работы разработана схема превращений (рис.), которая в последующем будет заложена в основу математической модели процесса гидроочистки вакуумного газойля. На первых этапах создания схемы, посредством изучения литературы выявлены основные реакции и компоненты, характеризующие процесс гидроочистки тяжелого нефтяного сырья.

Учитывая реакционную способность сероорганических соединений, которая убывает в ряду: диалкилдисульфиды > бензотиофен > алкилтиофены > дибензотиофен > алкилдибензотиофены [1], основными серосодержащими компонентами в вакуумном газойле приняты бензотиофен, дибензотиофен и их аналоги.

Таким образом, первичная формализованная схема химических превращений предопределяет сокращение размерности математической модели и количества экспериментально определяемых параметров. При этом сохранение чувствительности модели к составу сырья позволяет прогнозировать состав и качество продукта.

На основе составленной формализованной схемы превращений разработана кинетическая модель процесса гидроочистки вакуумного газойля, представляющая собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений изменения концентраций групп компонентов по времени. Допуская, что процесс является гомогенным, скорости реакций процесса могут быть записаны согласно закону действующих масс [3]. Уравнения возможных реакций процесса гидроочистки вакуумного газойля представлены в таблице.

**СЕКЦИЯ 12. СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ
ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ. ПОДСЕКЦИЯ 2 – ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ
ПОДГОТОВКИ И ПЕРЕРАБОТКИ ГОРЮЧИХ ИСКОПАЕМЫХ.**

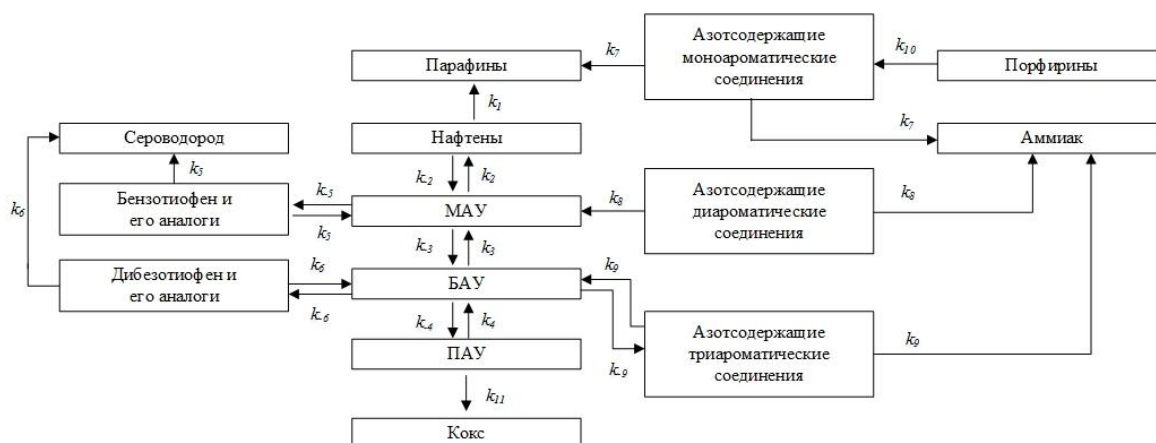


Рис. Схема превращения углеводородов и гетероатомных соединений в процессе гидроочистки вакуумного газойля, где МАУ – моноциклические ароматические углеводороды, БАУ – бициклические ароматические углеводороды, ПАУ – полициклические ароматические углеводороды; k_i – константа скорости i -й прямой реакции; k_{-i} – константа скорости i -й обратной реакции.

Таблица

Уравнения скоростей реакций процесса гидроочистки вакуумного газойля

№	Реакция	Прямая реакция	Обратная реакция
1	Дециклизация нафтенy	$W_1 = k_1 \cdot C_{Naft} \cdot C_{H_2}$	–
2	Гидрирование моноциклических ароматических углеводородов	$W_2 = k_2 \cdot C_{MAU} \cdot C_{H_2}^3$	$W_{-2} = k_{-2} \cdot C_{Naft}$
3	Гидрирование бициклических ароматических углеводородов	$W_3 = k_3 \cdot C_{DAY} \cdot C_{H_2}^2$	$W_{-3} = k_{-3} \cdot C_{MAU}$
4	Гидрирование полициклических ароматических углеводородов	$W_4 = k_4 \cdot C_{PAY} \cdot C_{H_2}$	$W_{-4} = k_{-4} \cdot C_{DAY}$
5	Гидродесульфуризации бензотиофена	$W_5 = k_5 \cdot C_{BT} \cdot C_{H_2}^3$	$W_{-5} = k_{-5} \cdot C_{MAU} \cdot C_{H_2S}$
6	Гидродесульфуризации дибензотиофена	$W_6 = k_6 \cdot C_{DBT} \cdot C_{H_2}^2$	$W_{-6} = k_{-6} \cdot C_{DAY} \cdot C_{H_2S}$
7	Гидродеазотирование азотсодержащих моноароматических соединений	$W_7 = k_7 \cdot C_{NMA} \cdot C_{H_2}^4$	–
8	Гидродеазотирование азотсодержащих диароматических соединений	$W_8 = k_8 \cdot C_{NDA} \cdot C_{H_2}^3$	–
9	Гидродеазотирование азотсодержащих триароматических соединений	$W_9 = k_9 \cdot C_{NTA} \cdot C_{H_2}^2$	–
10	Деметаллизация порфиринов ванадия и никеля	$W_{10} = k_{10} \cdot C_{Porf} \cdot C_{H_2S}$	–
11	Образование кокса	$W_{11} = k_{11} \cdot C_{PAY}$	–

Таким образом, метод математического моделирования позволит получить результаты для анализа и синтеза высокоэффективных химико-технологических систем, а также прогноза их оптимального поведения в течение длительного времени и выявления оптимального алгоритма их управления.

Литература

- Александров П.В. Процессы гидроочистки дизельных дистиллятов и вакуумного газойля на CoMo- и NiMo-катализаторах и их оптимизация с использованием метода математического моделирования: Автореферат. Дис. ... канд. техн. наук. – Томск, 2017. – 23 с.
- Анчита Х., Спейт Дж. Переработка тяжелой нефти. Реакторы и моделирование процессов / Под ред. О.Ф. Глаголевой. – СПб.: ЦОП «Профессия», 2015. – 592 с.
- Белинская Н.С., Францина Е.В., Луценко А.С., Белозерцева Н.Е., Иванчина Э.Д. Повышение эффективности процесса депарафинизации дизельного топлива путем оптимизации технологических режимов с помощью математической модели // Мир нефтепродуктов. – 2019. – № 7. – С. 24-32.
- Дик П.П. NiMo катализаторы гидрокрекинга вакуумного газойля, обеспечивающие высокий выход дизельной фракции. Дис. ... канд. хим. наук. – Новосибирск, 2016. – 23 с.
- Ivanchina E.D., Ivashkina E.N., Dolganova I.O., Belinskaya N.S. Mathematical modeling of multicomponent catalytic processes of petroleum refining and petrochemistry // Reviews in Chemical Engineering. – In Press.
- Плотников В.А. Цифровизация производства: теоретическая сущность и перспективы развития в российской экономике // Известия СПбГЭУ. – СПб., 2018. – № 4. – С. 16 – 24.